

# Computation of semiconductor properties using moments of the inverse scattering operator of the Boltzmann equation

**Doctoral Thesis****Author(s):**

Brugger, Simon Christian

**Publication date:**

2006

**Permanent link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-005143427>

**Rights / license:**

In Copyright - Non-Commercial Use Permitted

Diss. ETH No. 16376

# Computation of Semiconductor Properties Using Moments of the Inverse Scattering Operator of the Boltzmann Equation

A dissertation submitted to the  
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY  
ZURICH

for the degree of  
Doctor of Technical Sciences

presented by

SIMON CHRISTIAN BRUGGER

Dipl.-Phys. Eidgenössische Technische Hochschule Zürich  
born 17 July 1975  
citizen of Auenstein AG, Switzerland

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Wolfgang Fichtner, examiner  
Prof. Dr. Massimo Macucci, co-examiner

2005

# Abstract

Physical objects called moments of the inverse scattering operator (MISO) of the Boltzmann equation (BE) allow to compute all quantities which appear in semiconductor transport theory (e.g. mobilities, Hall factors, Langevin noise sources,  $\dots$ ) in an exact way, i.e. without using the well-known relaxation time approximation (RTA).

In the first part, the existence and uniqueness of the MISOs are proven, and a numerical algorithm is given to actually compute all of them. Some of the most important applications of the MISOs include amongst others the computation of Hall factors, and the computation of exact Langevin noise sources. They are further developed to compute the solution to the space-homogeneous Boltzmann equation (SHBE) for small field intensities to any order in the electric and magnetic field. Another application is the derivation of a new iterative scheme for the one-particle Monte Carlo (MC) method, which allows to take into account generation recombination (G-R) processes, which is not possible with the classical method. The last application presented is the determination of the transition from the low- to the high-field regime.

The second part deals with fluctuation theory: Using the concept of MISO, exact formal expressions are derived for the impedance field method (IFM) as well as for the acceleration fluctuation scheme (AFS). This allows to compare both methods on the same basis and, therefore, to better understand their meanings, implications, analogies and differences. It may be concluded that the IFM contains a formal flaw that seems not to affect the present applicability of the method, but should be considered during the development of future applications.

The third part introduces the numerical methods and physical models underlying the calculation of a series of physical properties of silicon and silicon devices further illustrated in part four. The finite element method (FEM) was chosen to compute the solutions to the transport model (TM) equations. Using the electric potential and quasi-Fermi potentials as variables and avoiding Bernoulli polynomials, leads to a suitable formulation for solving the TM equations. In order to use the MISOs in the far-from-equilibrium regime, a MC method has been used to solve the BE. Coupling of a MC method with the MISO allows not only to compute stationary states, but may even give access to Y-parameters and noise.

The last part deals with the application of the developed theory to bulk silicon and silicon devices. First, MISOs of interest are computed for the physical models contained in our in-house TM and MC simulator, SimnIC, for frequency dependent and independent scattering operators. Then, the MISOs are used to extract transport coefficients and noise sources in bulk silicon for low- and high-electric fields. Simulations of a simple  $N^+NN^+$  structure previously studied in the literature underline the applicability of MISOs for semiconductor small-signal analysis and noise modelling.

# Zusammenfassung

Momente des inversen Streuoperators der Boltzmann-Gleichung (sogenannte MISOs = Moments of the Inverse Scattering Operator) sind Funktionen, die die exakte Berechnung aller in der Halbleitertransporttheorie vorkommenden Größen erlauben und daher die übliche Relaxationszeit-Näherung nicht erfordern. Im ersten Teil der Arbeit wird die Existenz und Eindeutigkeit der MISOs bewiesen, und es wird ein Algorithmus hergeleitet, um sie im konkreten Fall berechnen zu können. Zu den wichtigsten Anwendungen der MISOs gehören die Berechnung von makroskopischen Relaxationszeiten für Transportmodelle, von Hall-Faktoren und von exakten Langevin-Rauschquellen. Das Konzept der MISOs wird dann weiterentwickelt, um die Lösung der raumhomogenen Boltzmann-Gleichung in allen Ordnungen im elektrischen und magnetischen Feld zu berechnen. Eine weitere Anwendung ist die Herleitung eines neuen iterativen Verfahrens für die Einteilchen-Monte-Carlo-Methode, das die Mitnahme von Generations-Rekombinationsprozessen zulässt. Als letzte Anwendung des ersten Teils wird gezeigt, wie man den Übergang vom Bereich schwacher Felder zum Bereich starker Felder bestimmen kann.

Inhalt der zweiten Teils ist die Fluktuationstheorie: Exakte, formale Ausdrücke werden sowohl für die generalisierte Impedanzfeld-Methode (GIFM) als auch für die Methode der Beschleunigungs-Fluktuationen mit Hilfe der MISOs hergeleitet. Dadurch können beide Methoden auf derselben Basis miteinander verglichen werden, was ein besseres Verständnis ihrer Bedeutungen, Folgen, Ähnlichkeiten und Unterschiede ermöglicht. Aus diesen Untersuchungen kann der Schluss gezogen werden, dass die GIFM einen Formfehler enthält, der

die praktische Anwendung der Methode jedoch vermutlich nicht in Frage stellt.

Der dritte Teil führt die numerischen Methoden und physikalischen Modelle ein, die die Grundlage für die Berechnung der physikalischen Grössen von Silizium sowie Silizium-Bauelementen im vierten Teil der Arbeit bilden. Für die numerische Lösung der Transportgleichungen wurde die Methode der finiten Elemente (FEM) gewählt. Es wird gezeigt, dass die Benutzung des elektrostatischen Potentials und des quasi-Fermi-Potentials als Lösungsvariablen zu einer geeigneten Formulierung führt, die ohne Bernoulli-Funktionen auskommt. Um die MISOs für Zustände weit entfernt vom thermodynamischen Gleichgewicht verwenden zu können, wurde ein Monte-Carlo-Simulator zur Lösung der Boltzmann-Gleichung entwickelt. Die Kombination von Monte-Carlo-Simulator und MISOs erlaubt nicht nur die Berechnung von stationären Zuständen, sondern auch die von Y-Parametern und möglicherweise sogar von Rauschparametern.

Im vierten und letzten Teil der Arbeit werden Anwendungen der dargestellten Theorie auf "bulk"-Silizium sowie Silizium-Bauelemente vorgestellt. Zuerst werden die relevanten MISOs für das physikalische Modell berechnet, das dem entwickelten MC-Simulator zugrunde liegt. Dann werden die MISOs verwendet, um Transport-Parameter und Rauschquellen von "bulk"-Silizium in schwachen und starken elektrischen Feldern zu extrahieren. Schliesslich wird die Anwendbarkeit der MISOs für die Bauelemente-Simulation illustriert, indem eine einfache, aus der Literatur bereits bekannte  $N^+NN^+$ -Struktur untersucht wird.